

Az BF61726 számú, „Nem egyensúlyi spin transzport és korrelációk nanostruktúrákban” című OTKA projekt zárójelentése

Ez a projekt atomi és mesterséges atomi struktúrák ill. felületek, vékony rétegek vizsgálatát célozta ab initio illetve térelméleti módszerek együttes használatával, különös tekintettel a mágneses tulajdonságokra ill. az idő és spinfüggő nem egyensúlyi transzporttulajdonságok vizsgálatára. Céljaink között szerepelt egyfelől olyan nem egyensúlyi módszerek alkalmazása/fejlesztése és egyszerű rendszerekbeli tesztelése, melyek lehetővé teszik korrelált rendszerekben az egyensúlyi és nem egyensúlyi transzport leírását. Így kiemelt szerepet kapott egy nem felxibilis numerikus renormálási csoport kód kifejlesztése és publikálása és alkalmazása, illetve a nem egyensúlyi „fluctuation exchange” közelítés (FLEX) kidolgozása. A metodológiai fejlesztés mellett a kutatás fontos komponense volt a mesterséges atomi rendszerek (kvantum dot rendszerek), mágneses atom-klaszterek, nanoszemcsék, mágneses szennyezők, illetve vékony rétegek elméleti vizsgálata.

Bár a projekt hivatalosan 2006 januárjában kezdődött, a kutatómunka teljes erővel csak 2006 őszétől indulhatott be, mert ekkor tudtuk a projekthez tartozó posztdoktori állásokat betölteni. Ezért kértünk engedélyt az OTKA-tól a projekt 2010 januárjáig való meghosszabbítására. A projekthez kapcsolódóan majd 50 különféle publikáció született, melyek közül **9 a Physical Review Letters, 23 pedig a Physical Review B** folyóiratokban, **9 pedig egyéb nemzetközileg referált folyóiratban** jelent meg. A megjelenteken kívül három további munkánk van a Physical Review Letterhez benyújtva, egy pedig jelenleg van előkészítés alatt. A projekthez kapcsolódóan **2 PhD** disszertáció született (Rapp Ákos (2008) ill. Tóth Anna (2009)), és még egy további disszertáció van előkészítés alatt (Horváth Bertalan). A projekt eredményei közül kiemelném egy **flexibilis NRG kódnak** a kifejlesztését és publikussá tételét [<http://www.phy.bme.hu/~dmnrg/>]. A projekthez kapcsolódóan számos meghívott előadást tartottunk nemzetközi konferenciákon ill. iskolákon (csak a projektvezető mintegy 20 meghívott konferencia előadást ill. kollokviumot tartott az elmúlt években), és a projektben résztvevő kutatók és diákok is számos előadást tartottak. A munka nyomán született eredményeket ilyen röviden leírni szinte lehetetlen. Ezért az alábbiakban – a teljesség igénye nélkül - csak a legfontosabb eredményeket emeljük ki.

Részletes eredmények

Kvantum dot (pötty) rendszerek transzporttulajdonságainak vizsgálata:

A mágneses atomok mesterséges realizációját kínálják a kvantum dotok. Ezekben a mesterséges atomokban ill. a belőlük épített „molekulákban” erősek a korrelációk, és az elektron-elektron kölcsönhatás domináns szerepet játszik. Ezeket a mesterséges atomokat sokkal kontrolláltabb módon lehet nem egyensúlyi körülmények között megfigyelni és vezető elektródákhoz csatolni, mint az igazi atomokat. Számos ilyen rendszer vezetési tulajdonságát vizsgáltuk a projekt során mind egyensúlyi, mind pedig nem egyensúlyi esetben.

Megvizsgáltuk, hogy milyen körülmények között lehetséges két csatolt mezoszkópikus kvantum dotban elérni az ún. két szennyezés Kondo kvantum kritikus pontot, amely a kvantum kritikus rendszerek egyik legismertebb példája [Zarand G, et al, Phys. Rev. Lett. 97, 166802 (2006)].

Megmutattuk, hogy a kvantum kritikus viselkedést a két dot közötti töltés transzport rontja el, és

javaslatot tettünk, hogy a gyakorlatban hogyan lehet ezt elnyomni: a két, vezetékek csatolt kvantum dot közé páros számú kvantum dotot kell illeszteni, melyek antiferromágneses láncot képeznek, és közvetítik a két dotra lokalizált elektron közötti kicserélődési kölcsönhatást, de ugyanakkor elnyomják a töltés transzportot. Megmutattuk, hogy a kvantum fázisátalakulás megfigyelhető a vezetési tulajdonságokban. Más, kísérletileg megvalósított csatolt dot rendszer dinamikus vezetőképességét is vizsgáltuk kombinált analitikus és numerikus módszerek segítségével. Így például tanulmányoztuk oldalról csatolt kvantum dotok vezetőképességét (itt csak az egyik kvantum dot csatolódik elektródákhoz), és megmutattuk, hogy egy „renormált” perturbatív renormálási csoport jól leírja ekkor a rendszer ac vezetőképességének viselkedését [Chung-Hou Chung, Gergely Zarand, Peter Wölfle, Phys. Rev. B 77, 035120 (2008)].

Megmutattuk, hogy egy csatolt kis kvantum dot - nagy kvantum dot rendszerben a nagy dot méretének ill. a két dot közötti csatolásnak a függvényében megváltozik a diszkrét energiaszintek spektruma [Kaul RK, Zarand G, Chandrasekharan S, et al, Phys. Rev. Lett. 96, 176802 (2006)]. Egy egzakt alapállapot tételt konstruáltunk, a gerjesztések kvantumszámait pedig perturbatív eszközökkel ill. Monte Carlo szimulációval határoztuk meg. Megmutattuk, hogy az energiaszintek fejlődése az erősen korrelált állapot felépülését tükrözi és hozzáférhető transzport méréseken keresztül [R.K. Kaul, et al., Phys. Rev. B 80, 035318 (2009)].

Egyik fontos célunk volt a nem egyensúlyi fluctuation exchange módszer kifejlesztése. Nem egyensúlyi számítások között legelőször részletesen feltérképeztük a nem egyensúlyi Anderson modell átlagtérelméletbeli fázisdiagrammját, és megmutattuk, hogy az átlagtérelmélet hiszterézishez és nem fizikai állapotok megjelenéséhez vezet [B. Horvath et al, Phys. Rev. B 77, 113108 (2008)]. Ezeket a spontán szimmetriasértett állapotokat mindenképpen el kell kerülni a perturbatív számítások során.

Ezt követően nagy energiát fektettünk a perturbatív nem egyensúlyi módszer egyszerű modelleken való tesztelésére. Tanulmányoztuk egy két nívós mesterséges atom ún. szingulett-triplett átmenetét, melyet a Hund csatolás illetve az erős elektron-elektron kölcsönhatás generál. Számos instabilitásba ütköztünk, melyeket nagyon nehezen, és csak részben sikerült eliminálnunk. Végül sikerült perturbatív módon leírni a teljes szingulett-triplett átmenetet [B. Horvath, et al, Journal of Physics: Condensed Matter, arXiv:0909.0441 (2009); B. Horváth et al, to be submitted to Phys. Rev. B]. Idén januárra sikerült végre eljutnunk odáig, hogy implementáltuk erre a többnívós rendszerre a FLEX-et olyan formában, hogy az tetszőleges más rendszerre is könnyen alkalmazható legyen [B. Horváth et al, unpublished].

A perturbatív módszerek visszasságait látva kezdtük el az erősen korrelált tartomány funkcionális renormálási csoporttal való vizsgálatát, és a nem egyensúlyi zaj számítását. Meghatároztuk például a spin keresztkorrelációkat a teljes frekvenciatartományban, mind az egyensúlyi, mind pedig a nem egyensúlyi esetben [C. P. Moca, I. Weymann, G. Zarand, Phys. Rev. Letter-hez benyújtva, arXiv:0907.0475]. Azt találtuk, hogy a spin keresztkorrelációkban alapvető szerepet játszik a Korringa energia, aminél kisebb energiákon a spin áram keresztkorrelációi elnyomódnak. Kifejlesztettünk továbbá egy általános funkcionális renormálási csoportot is, melynek segítségével sikerült a nem egyensúlyi véges feszültségű zajspektrumot is meghatározni [G. Zarand et al, to be submitted to Phys. Rev. Lett.].

Flexibilis DM-NRG kód:

A projekt egyik fontos eredménye annak a flexibilis c++ DMNRG kódnak a kifejlesztése, mely a világon jelenleg egyedülállóan ötvözi a nem Abeli szimmetriákat és a sűrűségmátrix renormálási csoportot dinamikus módon. A kód létrehozásához először egy általános rekurzív alakját kellett megadni a Wilson féle numerikus renormálási csoportnak. A kódot először a két csatornás Kondo rendszeren teszteltük. Először meghatároztuk a David Goldhaber-Gordon által kísérletileg vizsgált két csatornás Kondo rendszer dinamikus vezetőképességét, és numerikusan megvizsgáltuk, hogy milyen átcsapási görbéket kapunk az anizotrópiának illetve a külső mágneses térnek köszönhetően [A.I. Toth, L. Borda, J. von Delft, G. Zarand, Phys. Rev. B 76, 155318 (2007)]. Megmutattuk, hogy a szimmetriák használata nélkül számos esetben lehetetlen elérni a kellő numerikus pontosságot [Phys. Rev. B 78, 245109 (2008)]. A kód további teszteléseként meghatároztuk a két csatornás Kondo modell lokális dinamikai tulajdonságait [A.I. Toth and G. Zaránd, Phys. Rev. B 78, 165130 (2008)].

A programhoz kapcsolódóan web felületet, valamint egy 89 oldalas dokumentációt és számos mintainputot, analízáló rutint stb. készítettünk, majd publikussá tettük a mintegy 25,000 soros kódot [O. Legeza et al, arXiv:0809.3143 (2008); O. Legeza et al, <http://www.phy.bme.hu/~dmnrg/>]. A projektnek ehhez a részéhez kapcsolódóik egy sikeresen védett Ph.D. disszertáció is [A.I Tóth, PhD dolgozat, 2009, BME].

A kód további fejlesztése jelenleg is folyamatban van: Jelenleg további nem-Abeli szimmetriák implementálásán dolgozunk, valamint komplexesítjük a kódot. Bár a kódot úgy építettük, hogy az alkalmas legyen DMFT + NRG számításokra is, még ezt a rutint is szeretnénk jobban implementálni. A kifejlesztett c++ kódot szeretnénk kvantum információ alapú módszerekkel hatékonyabbá tenni. Részben ehhez kapcsolódnak azok a közlemények/munkák, amelyekben a DMRG-ben vizsgáljuk a kvantum entrópia szerepét. Összefoglaló keretében bemutattuk a kvantumos információelmélet alkalmazásának lehetőségeit a sűrűségmátrix renormálási csoport algoritmus terén. [Ö. Legeza, et al. Lect. Notes Phys. 739, 653-664 (2008)], Springer-Verlag],

Spin relaxáció vizsgálata:

Egy kvantum dotban izolált spint vizsgálva megmutattuk, hogy az a környezet elektromágneses fluktuációi hatására külső mágneses tér nélkül is relaxálódik spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében [P. San-Jose et al., Phys. Rev. Lett. 97, 076803 (2006)]. A relaxáció geometrai, egy véletlenszerű Berry fázis indukálja. Azt is megmutattuk, hogy alacsony külső tereknél a relaxációt a vezetékekbeli elektron-lyuk gerjesztések hozzák létre a közhiedelemmel ellentétben, nem pedig fononok. Az elméletet továbbfejlesztve megmutattuk, hogy hogyan lehet az adiabatikus spin relaxációt térelméletileg kezelni. Megmutattuk továbbá, hogyan használható ez az effektus spin manipulációra [Pablo San-Jose et al, Phys. Rev. B 77, 045305 (2008); P. San-Jose, et al., Physica E 40, 76 (2007)].

A fenti geometriai effektusokat más módon is ki lehet használni. A Karsruhei Egyetemmel együttműködésben tanulmányoztuk azt, hogy hogyan lehetséges a spin-pálya kölcsönhatást kihasználva pusztán gate-elektrodák használatával spint pumpálni. Megmutattuk, hogy ha egy

kvantum dot két szintje elegendően közel van egymáshoz, akkor lehetséges egy kontrollált rezonáns spin-pumpálás, melynek segítségével adiabatikus ciklusonként egy elektronspint lehet az elektródákba pumpálni. Ez igen meglepő, hiszen ebben az esetben az időtükrözés szimmetria egyetlen pillanatban sem sérül, csak az elektródák változtatása sérti azt [Valentina Brosco et al, submitted to Phys. Rev. Lett., arXiv:0912.1096].

Tanulmányoztuk azt is, hogy a mágneses szennyezők jelenléte hogyan vezet a mezoszkópikus transzport esetében inelasztikus szórásra: Ez utóbbit rendkívül fontos megérteni, hiszen ez szabja meg, hogy alacsony hőmérsékleten mennyire viselkednek koherensen a vezetési elektronok egy mezoszkópikus áramkörben. A T-mátrix nemperturbatív számításán alapuló elméletünket kiterjesztettük az Anderson modellre valamint a két csatornás Kondo modellre is. Az utóbbi érdekessége, hogy ebben az esetben az elektronok $T=0$ hőmérsékleten és a Fermi energián is inkohereznek, miután ez egy nem Fermi-folyadék modell. [G. Zarand and L. Borda, Physica E 40, 5 (2007); L. Borda et al., Phys. Rev. B 75, 235112 (2007)].

Spin transzport alacsonydimenziós rendszerekben:

Nemcsak szemcsék, hanem vékony rétegek illetve kvantum drótok esetében is tanulmányoztuk a spin transzportot. Így például megvizsgáltuk egy két-dimenziós elektrongáz spin Hall vezetőképességét Rashba csatolás jelenlétében a rendezetlenség függvényében [C. P. Moca, D. C. Marinescu, Phys. Rev. B 75, 035325 (2007)]. Azt találtuk, hogy a spin precessziós hossz határozza meg ezt, és az eredmények nem függenek jelentősen a szabad úthossztól.

Tanulmányoztuk továbbá, hogy a mágneses szennyezők hogyan befolyásolják a spin Hall-effektust [C. P. Moca and D. C. Marinescu, New Journal of Physics 9, 343 (2007)., valamint az anomális Hall effektust kétdimenziós esetben [T.S. Nunner et al, Phys. Rev. Lett. 100, 236602 (2008)]. Megmutattuk, hogy az irodalomban jelenlevő Berry-fázis alapú értelmezés nem lehetséges: A mágneses szennyezőkön való szórás az anomális Hall effektus előjelváltásához is vezethet, vagy például rezonáns anomális Hall szóráshoz.

Tanulmányoztuk továbbá a Rashba effektust olyan felületi állapotok esetében, amikor a szimmetria sérül (pl. C2v-re). Kifejlesztettünk egy újfajta kp perturbációszámítást, mely képes volt megmagyarázni a rendkívül nagy Rashba anizotrópia megjelenését ebben az esetben. Egyidejűleg ab initio számításokat is végeztünk arany felületre, ahol mintegy 5-szörös anizotrópiát találtunk [E. Simon et al, arXiv:1002.0776 (2010)].

A Notre Dame-i kísérleti csoporttal együttműködve vizsgáltuk meg vékony GaMnAs minták magnetoellenállását is. Meglepő módon a kísérleti adatokat tökéletesen tudtuk illeszteni az általunk kifejlesztett skálaelmélettel [C. P. Moca, et al. Phys. Rev. Lett. 102, 137203 (2009)]. Eredményeink szerint a rendezetlenség, a mágneses Mn atomokon való erős szórás együttesen vezetnek a megfigyelhető anomáliához a szennyezettebb mintákban, és az alacson hőmérsékleten ill. TC körül megfigyelhető anomáliáknak ugyanaz az eredetük.

Mágneses atomok és felületek:

Új mechanizmust mutattunk, mely felületek közelében mágneses anizotrópiát generál a szennyező mágneses atomon lévő spin-pálya kölcsönhatásnak köszönhetően [L. Szunyogh et al., Phys. Rev. Lett.

96, 067204 (2006)]. A mechanizmus lényege, hogy a felület által keltett Friedel oszcillációk a szennyező atomon spinjéhez az az atomi pályamomentumok segítségével csatolódnak. Ez a mechanizmus egy a kísérletekkel összhangban lévő anizotrópiát eredményez, mely sokkal erősebb, mint a korábban vizsgált mechanizmusok bármelyike.

A mágneses szennyezők felületi anizotrópiájának vizsgálatát folytatva Green függvényes perturbációs technikán alapuló számítás eredményképpen a felülettől mért távolság köbével fordított arányban csökkenő és a Fermi hullámszám kétszeresével oszcilláló szintfelhasadást kaptunk abban az esetben, amikor a spin-pálya kölcsönhatás a „bulkban” történik [O. Újsághy, L. Szunyogh, A. Zawadowski, Phys. Rev. B 75, 064425 (2007)].

A fenti munkákból azonban még nem volt egyértelmű, hogy a Zawadowski Alfréd és munkatársai által javasolt „bulk mechanizmus”, vagy az általunk javasolt lokális szennyezési mechanizmus [Szunyogh L, Phys. Rev. Lett. 96, 067204 (2006)] a felelős a felületi anizotrópiáért. Ezért azonos elméleti és numerikus megközelítésből, nevezetesen egy realiztikus paramétereken alapuló szoros kötésű Green függvényes technika segítségével összehasonlító vizsgálatot végeztünk a két modelre, réz és arany hordozó esetén. Számításaink azt a korábbi sejtésünket támasztották alá, hogy a lokális spin-pálya kölcsönhatás indukálta mágneses anizotrópia több nagyságrenddel erősebb effektus, mint amit a hordozó atomokon való spin-pálya szórás eredményez.

A korábban kifejlesztett Relativisztikus Rendezetlen Lokális Momentum (R-DLM) módszert alkalmaztuk ferromágneses vékonyrétegekre abból a célból, hogy meghatározzuk a mágneses anizotrópia energia hőmérsékletfüggését. Réz felületre helyezett kobalt vékonyrétegekre a kísérleti megfigyeléssel összhangban általában a felülettel párhuzamos mágnesezettségi irányt kaptunk, de a Curie hőmérséklet közelében számításaink reorientációra vezettek a felületre merőleges irányba [Á. Buruzs, et al., J. Magn. and Magn. Mat. 316, e371 (2007); Á. Buruzs, et al., Phys. Rev. B 76, 064417 (2007)]. Cu(100) felületre helyezett Fe-Co ötvözet nano-struktúrák mágneses tulajdonságainak elméleti vizsgálatát végeztük sűrűség funkcionál közelítésben. Megmutattuk, hogy ezekben a néhány atomból álló mágneses részecskékben a könnyű mágnesezettségi irány nagyban függ a részecskét alkotó atomok lokális kémiai környezetétől, rámutatva a széles körben használt átlagtér közelítés (CPA) alkalmazhatóságának korlátaira [C. Etz, et al., Phys. Rev. B 75, 245432 (2007)].

Spanyol partnereinkkel kiterjedt vizsgálatokat végeztünk Ru(0001) felületen növesztett Co rétegek mágneses orientációjának meghatározása terén, egyrészt a Co film vastagsága, másrészt a Co réteget fedő védőréteg anyagi minősége és ezen réteg vastagsága függvényében. A kísérletek többek között megállapították, hogy 4-5 atomi réteg vastag Co film esetén 1-2 atomi réteg vastag Au film képes a rendszer mágnesezettségét a filmre merőleges irányba állítani, míg vastagabb Au fedőréteg vagy más nemesfém (Cu, Ag) esetén a mágnesezettség a filmmel párhuzamos irányú marad. Részletes számítássorozattal, melyben rácsrelaxációs effektusokat is figyelembe vettünk, sikerült reprodukálnunk a fenti megfigyelést ill. a mágneses anizotrópia energia változásában megfigyelt kísérleti trendeket [S. Gallego et al, Philosophical Magazine B 88, 2655-2665 (2008); Gabaly et al, , New Journal Physics 10, 073024 (2008)].

Egyik legújabb munkánkban azt vizsgáljuk, hogy a Dzyaloshinskii-Moriya kölcsönhatás hogyan befolyásolja ultravékony rétegekben a magnonok királis degenerációját [L. Udvardi and L. Szunyogh, Phys. Rev. Lett. 102, 207204 (2009)]. Szimmetria érvek alapján osztályozzuk, hogy mikor léphet fel ilyen királis aszimmetria. W(110) felületre helyezett Fe monoréteget tanulmányozva ab initio

számításokat végeztünk, melyek valóban megerősítik a királis aszimmetriát ebben az esetben. Az eredményeinket egy egyszerűsített spin modell segítségével is sikerült interpretálnunk. Eredményeink tükrében lehetőség kínálkozik a Dzyaloshinskii-Moriya kölcsönhatás kísérleti meghatározására is.

Alacsonydimenziós mágneses modellek:

Főként a DMNRG fejlesztésekhez kapcsolódóan tanulmányoztunk számos egy dimenziós mágneses modellt is. Például az egy dimenziós periodikus határfeltétel mellett meghatározott Hubbard modellre olyan unitér bázisfüggvény transzformációt dolgoztunk ki, melynek révén a modell nyitott határfeltétel mellett vizsgálható [Ö. Legeza, F. Gebhard, J. Rissler, Phys. Rev B 74, 195112 (2006)]. Megmutattuk, hogy annak ellenére, hogy a transzformáció után a modell csak első és másodszeres kölcsönhatásokat tartalmaz, a sűrűségmátrix renormálási csoport (DMRG) algoritmussal végzett számolások hatékonysága nem nő.

Bemutattunk egy új módszert, mely lehetővé teszi alacsonydimenziós spin és fermion rendszerek esetében térben homogén és inhomogén fázisok között átalakulások tanulmányozását [Ö. Legeza, J. J. Betts, Phys. Rev. Lett. 99, 087203 (2007)]. Vizsgáltuk továbbá az egydimenziós tasztó $SU(n)$ Hubbard modellbeli Mott átalakulást [K. Buchta, Ö. Legeza, E. Szirmai, and J. Sólyom, Phys. Rev. B 75, 155108 (2007)], a vonzó $n=3$ esetben pedig variációs számítást végeztünk, és megmutattuk, hogy egy trionikus fázis alakulhat ki [Á. Rapp, et al., Phys. Rev. Lett. 98, 160405 (2007)].

Kiterjesztettük Sachdev és Young szemiklasszikus elméletét a Q -állapotú kvantum Potts modellre. Meghatároztuk mind a gapes, mind pedig a kvantum kritikus tartományban a dinamikus korrelációs függvényt, az utóbbi tartományban konform térelméletet alkalmazva [Rapp A and Zarand G, Phys. Rev. B 74, 014433 (2006)]. A gapes fázisban megmutattuk, hogy a spin korrelációs függvény diffúziós viselkedést mutat, ami azzal van kapcsolatban, hogy az alacsonyenergiás elmélet $SU(Q-1)$ szimmetriát mutat.